Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 16

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

1o. Semestre de 2015

Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:
http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5215

13/05/2015

OPERADORES – OBSERVÁVEIS RESUMIDAMENTE

1- no caso da posição o operador é o próprio valor da posição:

$$\hat{x} \Leftrightarrow x$$

2 - no caso do momento, operador é dado por:

$$\hat{p} \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\overline{p} = < p > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) dx$$

3 - no caso da energia, operador é dado por:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\overline{E} = < E > = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t) dx$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Esperamos que a Equação de Schrödinger incorpore os seguintes princípios fundamentais:

- A conservação de energia: este principio é tão básico que sua exclusão é impensável.
- A hipótese de de Broglie: mecânica quântica esta especificamente relacionada a partículas que mostram distintas propriedades de ondas.

O princípio de conservação de energia é definido pela equação:

$$E = E_c + E_p \qquad E_c = \frac{p^2}{2m}$$

Substituindo a equação de de Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m}$$

Vamos assumir, por simplicidade, que a parte da função de onda da partícula independente do tempo, em uma dimensão, pode ser escrita como:

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Acabamos de ver que: $E_c = \dfrac{h^2}{2\lambda^2 m}$ então : $E_c = \dfrac{h^2}{2\lambda^2 m} = E - E_p$

A equação:

$$\psi = Asenkx$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2(E - E_p)m}$$

A derivada segunda desta equação é:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A\sin kx = -k^2\psi \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2 \frac{2(E - E_p)m}{h^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_p)\psi$$

Esta equação é a forma unidimensional da **equação de Schrödinger**

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Vimos que :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_p)\psi$$

Vamos re-escrever:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_p)\psi$$

$$-\frac{2m}{\hbar}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - E_p)\psi$$

$$-\frac{2m}{\hbar}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p\psi = E\psi$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Para uma função de onda dependente de x e t $\psi(x,t)$

Equação de Schrödinger dependente do tempo

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

A forma mais geral da **equação de Schrödinger dependente do tempo** para uma partícula que se move em um potencial em uma dimensão:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Nosso objetivo é resolver esta equação para diversas formas de V(x,t)

Inicialmente vamos pensar na partícula livre em que não age nenhuma força sobre esta

$$\psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}ou$$

$$\psi(x,t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$E=h\nu=\hbar 2\pi\nu=\hbar\omega$$

$$p=\frac{h}{\lambda}=\frac{\hbar 2\pi}{\lambda}$$

$$k=\frac{2\pi}{\lambda},\ p=\hbar k$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\left(\frac{i}{\hbar}p\right)\left(\frac{i}{\hbar}p\right)Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\psi(x,t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}EAe^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)}=-\frac{i}{\hbar}E\psi$$

Substituindo e usando V(x,t) = Vo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)\psi(x,t)+V_0\psi(x,t)=i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\right)E\psi(x,t)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m}\right)\psi(x,t)+Vo\,\psi(x,t)=E\psi(x,t)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m}\right)+Vo=E$$

Energia total da partícula se conserva

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

Geralmente estudaremos os casos que correspondem a situações de onda estacionária:

átomo de hidrogênio,

Partículas em uma caixa

Oscilador harmônico

Nestes casos o potencial V não depende explicitamente do tempo V(x,t)=V(x) – Utilizaremos neste caso a ideia de separação de variáveis:

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Cuja parte espacial, chamada de autofunção é obtida pela equação diferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

A densidade de probabilidade neste caso: :

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}dx$$

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Ou seja não depende do tempo. Essas soluções são chamadas de estados estacionários

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

Para ter sentido físico, devemos impor várias condições

- As funções de onda e sua primeira derivada, para serem soluções aceitáveis precisam:
  - Ser finita (não podemos aceitar que $\psi(x) = \infty; x \to 0$ partícula tem que ter ser movimento em uma região do espaço
  - Ser unívoca (a função de onda não pode ter múltiplos valores)
  - Se contínua (pois se temos funções descontínuas as derivadas serão infinitas nos pontos de descontinuidade)
- Essas condições são necessárias para que as funções de onda representem os observáveis de maneira adequada

Agora vamos ver alguns casos e aplicações